ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р4 - 11156

Е.Б.Бальбуцев, И.Н.Михайлов

НИЖНЯЯ ГРАНИЦА ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ МНОГИХ ФЕРМИОНОВ

1977

P4 - 11156

Е.Б.Бальбуцев, И.Н.Михайлов

НИЖНЯЯ ГРАНИЦА ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ МНОГИХ ФЕРМИОНОВ

Направлено в "Journal Physics. A"

Бальбуцев Е.Б., Михайлов И.Н. P4 - 11156

Нижняя граница энергии системы многих фермионов

Предложен метод оценки снизу энергии основного состояния системы многих фермионов, который является существенным улучшением известных методов Поста и Холла. Его возможности демонстрируются на точно решаемой задаче многих тел с осцилляторным взаимодействием.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1977

Balbutsev E.B., Mikhailov I.N. P4 - 11156

Energy Lower Bound of Many-Fermion System

A more detailed consideration of a trial wave function antisymmetry makes it possible to raise an energy lower bound of a many-fermion system. The method is particularly effective for a small number of particles.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1977

1. Введение

В настоящей работе рассматривается трансляционно-инвариантная система N тождественных фермионов с бинарным взаимодействием $v(\vec{r}_i-\vec{r}_j)$. Предлагается усовершенствование метода получения нижней границы $\mathcal{E}$ энергии основного состояния системы E_0, предложенного в /I,2/. Там E_0 определяется как минимум функционала $\langle\Psi|\mathcal{H}|\Psi\rangle$, где $\mathcal{H}=\sum_{i=2}^{N}\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\vec{\rho}_i^{\,2}}+\frac{N}{2}v(\rho_i)\right\}=\sum_{i=2}^{N}h_i$ – модельный оператор со своими собственными функциями Φ_α и собственными значениями ε_α $\left(\mathcal{H}\Phi_\alpha=\varepsilon_\alpha\Phi_\alpha,\ \Phi_\alpha=\det\varphi_n(\vec{\rho}_i),\ h_i\varphi_n=e_n\varphi_n(\vec{\rho}_i)\right)$; $\mu=\frac{N-1}{N}m$ – приведённая масса частицы; $\vec{\rho}_i=\vec{r}_i-\vec{r}_1$; $\Psi(\vec{\rho}_2,\vec{\rho}_3,\ldots,\vec{\rho}_N)$ – пробная функция, которая должна быть антисимметрична по N частицам: I,2, ..., N. Авторы /I,2/ антисимметризуют Ψ только по $N-1$ частицам: 2,3, ..., N. Тем самым они расширяют класс пробных функций и получают в результате оценку снизу для E_0.

2. Улучшение метода Карра и Поста

Известно, что всякая антисимметричная функция обращается в нуль при совпадении координат $\vec{r}_i$ любых двух частиц. Функция, зависящая от относительных координат $\vec{\rho}_i=\vec{r}_i-\vec{r}_1$, должна, следовательно, обращаться в нуль при $\vec{\rho}_i=0$. На этом и основана идея улучшения оценки: антисимметризуя Ψ только по частицам 2,3, ..., N, требовать ее обращения в нуль также при $\vec{\rho}_i = 0$. Вариационная задача теперь выглядит так:

$$\mathcal{E} = \min \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle \ , \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = 1,$$

$$\Psi(\vec{\rho}_2, \dots, \vec{\rho}_{i-1}, \vec{\rho}_i = 0, \vec{\rho}_{i+1}, \dots, \vec{\rho}_N) = 0.$$

Разложив пробную функцию по собственным функциям $\mathcal{H}$,

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} C_{\alpha_n} \varPhi_{\alpha_n}(\vec{\rho}_2, \dots, \vec{\rho}_N),$$

получаем систему уравнений на коэффициенты C_α:

$$\mathcal{E} = \min \sum_{n=1}^{\infty} |C_{\alpha_n}|^2 \mathcal{E}_{\alpha_n},$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} |C_{\alpha_n}|^2 = 1, \tag{I}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} C_{\alpha_n} \varPhi_{\alpha_n}(\vec{\rho}_2, \dots, \vec{\rho}_i = 0, \dots, \vec{\rho}_N) = 0. \tag{2}$$

Решение этой вариационной проблемы продемонстрируем на одномерной системе 4 частиц с осцилляторным взаимодействием. По ходу решения станет ясно, как его можно обобщить.

Рассмотрим первый член в сумме (2), положив в нём $i = 2$.

$$\varPhi_{012}(x_2 = 0, x_3, x_4) = \begin{vmatrix} \varphi_0(0) & \varphi_1(0) & \varphi_2(0) \\ \varphi_0(x_3) & \varphi_1(x_3) & \varphi_2(x_3) \\ \varphi_0(x_4) & \varphi_1(x_4) & \varphi_2(x_4) \end{vmatrix} = \varphi_0(0) \begin{vmatrix} \varphi_1(x_3) & \varphi_2(x_3) \\ \varphi_1(x_4) & \varphi_2(x_4) \end{vmatrix} + \varphi_2(0) \begin{vmatrix} \varphi_0(x_3) & \varphi_1(x_3) \\ \varphi_0(x_4) & \varphi_1(x_4) \end{vmatrix}.$$

Напомним, что нечётные полиномы Эрмита обращаются в нуль при $x = 0$. Следующий член в (2):

$$\varPhi_{013}(0, x_3, x_4) = \varphi_0(0) \begin{vmatrix} \varphi_1(x_3) & \varphi_3(x_3) \\ \varphi_1(x_4) & \varphi_3(x_4) \end{vmatrix}.$$

И так далее. Сумма в (2) состоит из всевозможных детерминантов второго порядка. Поскольку все они линейно-независимы, а равенство (2) должно выполняться при любых значениях x_3, x_4, нужно приравнять нулю коэффициенты при каждом детерминанте. Так, из условия (2) получаем бесконечную систему линейных однородных уравнений на C_α, которая состоит из отдельных, не связанных друг с другом, групп уравнений. Вот несколько первых групп:

$$\begin{cases} C_{012}\varphi_2 + C_{014}\varphi_4 + C_{016}\varphi_6 + \dots \equiv f_{01} = 0, \\ C_{012}\varphi_0 + C_{412}\varphi_4 + C_{612}\varphi_6 + \dots \equiv f_{21} = 0, \\ C_{014}\varphi_0 + C_{412}\varphi_2 + C_{416}\varphi_6 + \dots \equiv f_{41} = 0, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots, \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{013}\varphi_0 + C_{213}\varphi_2 + C_{413}\varphi_4 + \dots \equiv f_{13} = 0, \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{032}\varphi_2 + C_{034}\varphi_4 + C_{036}\varphi_6 + \dots \equiv f_{03} = 0, \\ C_{032}\varphi_0 + C_{432}\varphi_4 + C_{632}\varphi_6 + \dots \equiv f_{23} = 0, \\ C_{034}\varphi_0 + C_{432}\varphi_2 + C_{436}\varphi_6 + \dots \equiv f_{43} = 0, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots, \end{cases} \tag{3}$$

$$\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$

Теперь можно варьировать $\mathcal{E}$ по C_α, учитывая дополнительные условия (I) и (3), как обычно, с помощью неопределённых множителей Лагранжа:

$$\delta \left\{ \mathcal{E} - \lambda \sum_{n=1}^{\infty} |C_{\alpha_n}|^2 - \mu_{01} f_{01} - \mu_{21} f_{21} - \dots - \mu_{13} f_{13} - \mu_{03} f_{03} - \dots \right\} = 0.$$

Отсюда находим выражения для коэффициентов C_α :

$$C_{012}=\frac{\mu_{01}\varphi_2+\mu_{21}\varphi_0}{2(\varepsilon_{012}-\lambda)}\,,\quad C_{014}=\frac{\mu_{01}\varphi_4+\mu_{41}\varphi_0}{2(\varepsilon_{014}-\lambda)}\,,\quad C_{016}=\frac{\mu_{01}\varphi_6+\mu_{61}\varphi_0}{2(\varepsilon_{016}-\lambda)}\,,\dots,$$

$$C_{412}=\frac{\mu_{21}\varphi_4+\mu_{41}\varphi_2}{2(\varepsilon_{412}-\lambda)}\,,\quad C_{612}=\frac{\mu_{21}\varphi_6+\mu_{61}\varphi_2}{2(\varepsilon_{612}-\lambda)}\,,\quad\dots,$$

$$\dots\dots\dots\dots\dots,$$

$$C_{013}=\frac{\mu_{13}\varphi_0}{2(\varepsilon_{013}-\lambda)}\,,\quad C_{213}=\frac{\mu_{13}\varphi_2}{2(\varepsilon_{213}-\lambda)}\,,\quad C_{413}=\frac{\mu_{13}\varphi_4}{2(\varepsilon_{413}-\lambda)}\,,\dots,$$

$$\dots\dots\dots\dots\dots$$

Подставляя их в (3), получаем систему линейных однородных уравнений на μ :

$$\left\{\begin{aligned}&\frac{\mu_{01}\varphi_2^2+\mu_{21}\varphi_0\varphi_2}{\varepsilon_{012}-\lambda}+\frac{\mu_{01}\varphi_4^2+\mu_{41}\varphi_0\varphi_4}{\varepsilon_{014}-\lambda}+\frac{\mu_{01}\varphi_6^2+\mu_{61}\varphi_0\varphi_6}{\varepsilon_{016}-\lambda}+\dots=0,\\ &\frac{\mu_{01}\varphi_2\varphi_0+\mu_{21}\varphi_0^2}{\varepsilon_{012}-\lambda}+\frac{\mu_{21}\varphi_4^2+\mu_{41}\varphi_2\varphi_4}{\varepsilon_{412}-\lambda}+\frac{\mu_{21}\varphi_6^2+\mu_{61}\varphi_2\varphi_6}{\varepsilon_{612}-\lambda}+\dots=0,\\ &\dots\dots\dots\dots\dots,\\ &\frac{\mu_{13}\varphi_0^2}{\varepsilon_{013}-\lambda}+\frac{\mu_{13}\varphi_2^2}{\varepsilon_{213}-\lambda}+\frac{\mu_{13}\varphi_4^2}{\varepsilon_{413}-\lambda}+\dots=0,\\ &\dots\dots\dots\dots\dots\end{aligned}\right. \tag{4}$$

Нетривиальное решение здесь может существовать, если определитель системы равен нулю. Так получается уравнение на λ . Поскольку система (4) так же, как и (3), состоит из отдельных, не связанных друг с другом групп уравнений, то её

определитель будет иметь клеточно-диагональный вид и будет равен произведению определителей, соответствующих каждой подсистеме. Следовательно, можно найти решение, приравняв нулю любой из этих определителей. Например, из первой подсистемы получаем:

$$\begin{vmatrix}\left(\frac{\varphi_2^2}{\varepsilon_{012}-\lambda}+\frac{\varphi_4^2}{\varepsilon_{014}-\lambda}+\frac{\varphi_6^2}{\varepsilon_{016}-\lambda}+\dots\right) & \frac{\varphi_2\varphi_0}{\varepsilon_{210}-\lambda} & \frac{\varphi_4\varphi_0}{\varepsilon_{410}-\lambda} & \dots\\ \frac{\varphi_0\varphi_2}{\varepsilon_{012}-\lambda} & \left(\frac{\varphi_0^2}{\varepsilon_{210}-\lambda}+\frac{\varphi_4^2}{\varepsilon_{214}-\lambda}+\frac{\varphi_6^2}{\varepsilon_{216}-\lambda}+\dots\right) & \frac{\varphi_4\varphi_2}{\varepsilon_{412}-\lambda} & \dots\\ \frac{\varphi_0\varphi_4}{\varepsilon_{014}-\lambda} & \frac{\varphi_2\varphi_4}{\varepsilon_{214}-\lambda} & \left(\frac{\varphi_0^2}{\varepsilon_{410}-\lambda}+\frac{\varphi_2^2}{\varepsilon_{412}-\lambda}+\frac{\varphi_6^2}{\varepsilon_{416}-\lambda}+\dots\right) & \dots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{vmatrix}=0\,. \tag{5}$$

Из второй подсистемы:

$$\frac{\varphi_0^2}{\varepsilon_{013}-\lambda}+\frac{\varphi_2^2}{\varepsilon_{213}-\lambda}+\frac{\varphi_4^2}{\varepsilon_{413}-\lambda}+\dots=0\,. \tag{6}$$

И так далее. Большинство получающихся определителей – бесконечного ранга. Их матричные элементы довольно быстро убывают с ростом номера строки и столбца. Поэтому можно находить λ с любой степенью точности, обрезая определители.

Искомая нижняя граница энергии равна наименьшему значению λ. Заранее неизвестно, какое из уравнений, (5), (6) или какое-либо другое, имеет своим решением наименьшее $\lambda=\lambda_0$. Однако мы знаем, что решения уравнения (5) находятся выше ε_{012}, решения уравнения (6) – выше ε_{013} , решения следующего уравнения – выше ε_{023} и т.д. Так что, если λ_0 , найденное из (5), меньше ε_{013} , то задача решена. Если же оно больше ε_{013} , то нужно будет сравнивать его с решением уравнения (6). Если оба эти решения, в свою очередь, окажутся выше $\mathcal{E}_{023}$, то придётся решить и следующее уравнение. И так далее. Ясно, что эта процедура не бесконечна, так как мы не должны подняться выше точного значения энергии.

Нетрудно увидеть, что описанный способ решения вариационной задачи без каких бы то ни было изменений распространяется на системы с $N>4$.

Для $N\leq 10$ мы вычислили отношения нижней границы $\mathcal{E}$ к точному значению E_0. Они приведены в таблице вместе с аналогичными отношениями, которые можно получить из работ Карра и Поста /I,2/:

$$\mathcal{E}/E_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{N-1}{N+1}\sqrt{\frac{N}{N-1}}\,.$$

Там же приведены и отношения $\mathcal{E}/E_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\frac{N-1}{N+1}$ из работы /3/, полученные другим методом. Сравнение данных показывает, что усовершенствованный нами метод Карра и Поста даёт лучшие результаты при $N\leq 9$. При $N\geq 10$ лучше работает метод Холла.

Всё сказанное до сих пор относилось к одномерному гармоническому осциллятору. Обобщение на трехмерную систему с произвольным взаимодействием тривиально. Достаточно только заметить, что во всех уравнениях, (5), (6) и т.д, фигурируют волновые функции, которые не равны нулю в нуле. То же самое будет справедливо и в общем случае, т.е. в уравнениях будут появляться только волновые функции s – состояний.

Таблица

Отношения нижних границ к точным энергиям для одномерной системы N фермионов с осцилляторным взаимодействием

	N	2	3	4	5	6	7	8	9	I0
$\mathcal{E}/E_0$	Эта работа	I	0,70	0,7I	0,69	0,7I	0,70	0,7I	0,70	0,70
	/I,2/	0,33	0,43	0,49	0,53	0,55	0,57	0,59	0,60	0,6I
	/3/	0,29	0,43	0,52	0,58	0,62	0,65	0,67	0,69	0,7I

Литература

I. R.J.M. Carr, H.R.Post. J.Phys., A1, 596 1968 .

2. R.J.M. Carr, H.R.Post. J.Phys., A10, L59 1977 .

3. R.L. Hall. Proc. Phys. Soc 91 , 16 1967 .

Рукопись поступила в издательский отдел
I3 декабря I977 года.